

Title	Mellin-Barnes型の積分の方法によるLattice Green's Functionの計算 (科学計算基本ライブラリーのアルゴリズム)
Author(s)	桂, 重俊; 猪苗代, 盛; 阿部, 芳彦
Citation	数理解析研究所講究録 (1971), 115: 193-205
Issue Date	1971-04
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/106425">http://hdl.handle.net/2433/106425</a>
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

Mellin-Barnes 型の積分の方法による  
Lattice Green's Function の計算

東北大工、理 桂重俊、猪苗代盛<sup>\*</sup> 阿部芳彦<sup>\*</sup>

昨年、本研究会において我々は Extended Watson Integral と Mellin-Barnes 型の積分の方法と計算する事を報告した。今回は更に一般化した Lattice Green's Function (以下 L.G.F. と略す) 時に Tetragonal lattice の L.G.F. を中心に述べる<sup>1)</sup>。

Mellin-Barnes 型の積分の方法により Simple cubic lattice の L.G.F. は桂、猪苗代、阿部<sup>2)</sup>によつて、Rectangular & v Square lattice の L.G.F. は桂、猪苗代<sup>3)</sup>によつて与えられてゐる。

今、Orthorhombic lattice の任意の格子点における L.G.F. を考えよう。

$$I(a; l, m, n; \alpha, \beta, \gamma) \\ = \frac{1}{\pi^3} \iiint_0^\pi \frac{\cos lx \cos my \cos nz}{a + i\varepsilon - \alpha \cos x - \beta \cos y - \gamma \cos z} dx dy dz \quad (1)$$

$l, m, n$  はそれぞれ  $x$ -,  $y$ -,  $z$ -方向の格子点の位置 & v force constant である。

$$\begin{aligned}
 (1) &= -\frac{1}{\pi^3} \int_0^\infty dt \left( \iiint_{\cdot}^{\pi} dx dy dz \cos lx \cos my \cos nz \right. \\
 &\quad \left. \times e^{i(a+i\varepsilon - \alpha \cos x - \beta \cos y - \gamma \cos z)t} \right) \\
 &= (-i)^{p+1} \int_0^\infty e^{i(a+i\varepsilon)t} J_l(\alpha t) J_m(\beta t) J_n(\gamma t) dt \quad (2) \\
 &\quad (p = l+m+n)
 \end{aligned}$$

以下  $z$  は Tetragonal lattice に ついて 考 え、最後 に 再 び  
Orthorhombic lattice に ついて 考 え る。Tetragonal lattice  $z$   
は  $\beta, \gamma \rightarrow 1, \alpha \rightarrow \gamma$  と 1. 更に  $l \geq 0, m \geq n \geq 0$  と する。

(2) 式  $z$

$$\begin{aligned}
 J_\mu(z) J_\nu(z) &= \frac{1}{\mu! \nu!} \left(\frac{z}{2}\right)^{\mu+\nu} {}_2F_3 \left( \begin{matrix} \frac{\mu+\nu}{2} + 1, \frac{\mu+\nu+1}{2} \\ \mu+1, \nu+1, \mu+\nu+1 \end{matrix} ; -z^2 \right) \quad (3) \\
 &= \left(\frac{z}{2}\right)^{\mu+\nu} \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{P(2s+\mu+\nu+1) P(-s)}{P(s+\mu+1) P(s+\nu+1) P(s+\mu+\nu+1)} \left(\frac{z^2}{4}\right)^s ds \quad (4)
 \end{aligned}$$

$\varepsilon$  用 113.  $C$  は 複素  $s$  平面  $z$   $s = -\Delta$  ( $\Delta \rightarrow +0$ )  $z$  実軸 と 交 わ る  
虚軸 に 平行 な 直線  $z$  あり。積分 の 順序  $\varepsilon$  交換 12

$$\begin{aligned}
 I &= (-i)^{p+1} \left(\frac{1}{2}\right)^{m+n} \frac{1}{2\pi i} \int_C ds \frac{P(2s+m+n+1) P(-s)}{P(s+m+1) P(s+n+1) P(s+m+n+1)} \left(\frac{1}{4}\right)^s \\
 &\quad \times \int_0^\infty e^{i(a+i\varepsilon)t} J_l(\gamma t) t^{m+n+2s} dt \quad (5)
 \end{aligned}$$

$\varepsilon > 0, p \geq 0$   $z$   $\int dt$  は 収束 12

$$\begin{aligned}
 I &= \frac{1}{a} \left(\frac{1}{2a}\right)^p \frac{\gamma^l}{l!} \frac{1}{2\pi i} \int_C ds \frac{P(2s+p+1) P(2s+m+n+1) \left(-\frac{1}{4a^2}\right)^s}{P(s+m+1) P(s+n+1) P(s+m+n+1)} \\
 &\quad \times {}_2F_1 \left( s + \frac{p}{2} + 1, s + \frac{p+1}{2} ; l+1 ; \frac{\gamma^2}{a^2} \right) \quad (6)
 \end{aligned}$$

今,  $|a| > |Y|$  ならば  ${}_2F_1$  を展開して summation と積分の順序

を交換して

$$I = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a}\right)^{p+1} 2^{m+n} Y^l \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k! \Gamma(k+l+1)} \left(\frac{Y^2}{a^2}\right)^k \\ \times \frac{1}{2\pi i} \int ds \frac{\Gamma(s + \frac{m+n+1}{2}) \Gamma(s + \frac{m+n}{2} + 1) \Gamma(s + \frac{p}{2} + k + \frac{1}{2})}{\Gamma(s+m+1) \Gamma(s+n+1) \Gamma(s+m+n+1)} \\ \times \Gamma(s + \frac{p}{2} + k + 1) \Gamma(-s) \left(-\frac{4}{a^2}\right)^s \quad (1)$$

$|a| \gg 2$  を考える. 積分路は右半面に閉じて, 被積分関数は

$Y$  の領域内では

$$s = j, \quad j = 0, 1, 2, \dots, \infty$$

の pole をとり,  $Y$  の residue の和を求めると

$$I = \frac{1}{a} \left(\frac{1}{2a}\right)^p Y^l \sum_k \sum_j \frac{\Gamma(m+n+2j+1) \Gamma(p+2j+2k+1)}{k! j! \Gamma(l+k+1) \Gamma(m+j+1) \Gamma(n+j+1)} \\ \times \frac{Y^{2k}}{\Gamma(m+n+j+1)} \left(\frac{1}{4a^2}\right)^{k+j} \quad (2)$$

hypergeometric function を 2 変数に拡張した Kampé de Fériet

function\* を用いると

$$I = \frac{2 p! Y^l}{l! m! n!} \left(\frac{1}{2a}\right)^{p+1} F \left[ \begin{array}{c} 2 \\ 2 \\ 0 \\ 3 \end{array} \left| \begin{array}{c} \frac{p+1}{2}, \frac{p}{2} + 1 \\ \frac{m+n+1}{2}, \frac{m+n}{2} + 1; \alpha_1, \alpha_2 \\ m+1, n+1, m+n+1 \\ ; l+1, \alpha_1, \alpha_2 \end{array} \right. \right] \frac{4}{a^2}, \frac{Y^2}{a^2} \quad (3)$$

$\alpha_1, \alpha_2$  は任意. 但し  $\neq 0, -1, -2, \dots$

二重級数 (8) の収束領域は  $|a| > 2 + |\gamma|$  と考へる。今 (8) の二重級数

を一般に

$$I \propto \sum_k \sum_j A_{k,j} x^k y^j$$

と置く  $x = y = \frac{1}{a^2}$ 。  $x$  と  $y$  の収束半径を各々  $r_x, r_y$  とする

$$\frac{1}{r_x} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{A_{k+1,j}}{A_{k,j}} = \gamma^2 \left(1 + \frac{1}{c}\right)^2 \quad \left(c \equiv \frac{k}{j}\right)$$

$$\frac{1}{r_y} = \lim_{j \rightarrow \infty} \frac{A_{k,j+1}}{A_{k,j}} = 4(1+c)^2$$

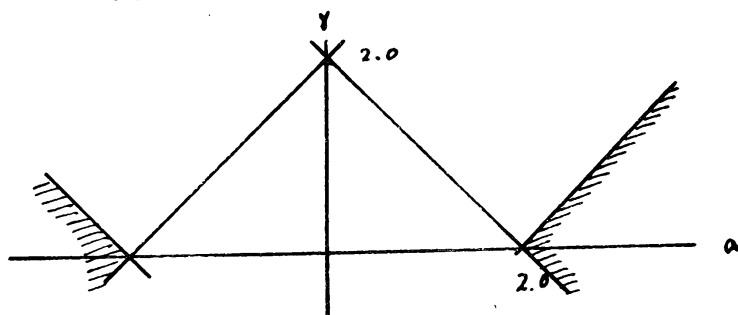
$c$  を消去する

$$2\sqrt{r_x} + |\gamma|\sqrt{r_y} = 1$$

$r_x = r_y$  とする

$$\sqrt{r_x} = \frac{1}{2 + |\gamma|} \quad (10)$$

従つて、二重級数 (8) は  $|a| > 2 + |\gamma|$  で収束する。



また (8) 式を  $k' = k + j$  と置く

$$I = \frac{1}{a} \left(\frac{1}{2a}\right)^p \gamma^L \sum_{k'=0}^{\infty} P(p + 2k' + 1) \left(\frac{\gamma^2}{4a^2}\right)^{k'}$$

$$\times \sum_{j=0}^{k'} \frac{P(m+n+2j+1) \gamma^{-2j}}{j! P(k'-j+1) P(1+k'-j+1) P(m+j+1) P(n+j+1) P(m+n+j+1)} \quad (11)$$

を得る。これは全く  $P$ -function の argument が正の整数である  
 3 番目の summation に  $\alpha$  が含まれていない実数。数値  
 計算に都合が良い。また Simple cubic lattice の場合<sup>2)</sup> には

(9) 式は

$$I_{s.c} = \frac{1}{\alpha} F \left[ \begin{array}{c|c} 2 & \frac{1}{2}, 1 \\ 1 & \frac{1}{2}; \alpha \\ 0 & \\ 2 & 1, 1; 1, \alpha \end{array} \middle| \begin{array}{c} \frac{4}{\alpha^2}, \frac{1}{\alpha^2} \end{array} \right] \quad (12)$$

を得る。これは桂猪苗代阿部の結果に一致する。<sup>2)</sup>  $\alpha$  は任意。

次に  $|a| \ll 2$  の場合を考える。(9) 式の積分路は左半面に

閉じる。被積分関数の pole は

(i) 半整数の double pole

$$s = -\left[\frac{p+1}{2}\right] - k - j - \frac{1}{2}, \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

(ii) 半整数の (single) pole

$$s = -\left[\frac{m+n+1}{2}\right] - j - \frac{1}{2}, \quad j = 0, 1, \dots, \left[\frac{p+1}{2}\right] - \left[\frac{m+n+1}{2}\right] + k - 1$$

$m - \left[\frac{p}{2}\right] \geq 1$  の場合 には

(iii) 整数の (single) pole

$$s = -\left[\frac{p}{2}\right] - k - j - 1, \quad j = 0, 1, \dots, m - \left[\frac{p}{2}\right] - k - 1$$

$$k \geq 1 \quad m - \left[\frac{p}{2}\right] - 1 \geq k$$

最初の pole は

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \frac{i}{2\pi} \left(-\frac{\gamma}{2}\right)^k \left(\frac{a}{2}\right)^{2\left[\frac{p+1}{2}\right]-p} \frac{1}{\Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] - \left[\frac{p}{2}\right] + \frac{1}{2}\right)} \\
 &\quad \times \sum_k \frac{\Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] - m + k + \frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] - m + k + \frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] + k + \frac{1}{2}\right)}{k! \Gamma(k+1) \Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] - \frac{m+n}{2} + k + \frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] - \frac{m+n}{2} + k + 1\right)} \\
 &\quad \times \Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] - m - n + k + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{\gamma^2}{4}\right)^k \times \left({}_4\hat{F}_3 + i {}_4F_3\right) \\
 {}_4F_3 &= {}_4F_3 \left( \begin{matrix} \left[\frac{p+1}{2}\right] - m + k + \frac{1}{2}, \left[\frac{p+1}{2}\right] - m + k + \frac{1}{2}, \left[\frac{p+1}{2}\right] + k + \frac{1}{2} \\ \left[\frac{p+1}{2}\right] - \frac{m+n}{2} + k + \frac{1}{2}, \left[\frac{p+1}{2}\right] - \frac{m+n}{2} + k + 1 \\ \left[\frac{p+1}{2}\right] - m - n + k + \frac{1}{2} \end{matrix} ; \frac{a^2}{4} \right) \quad (13) \\
 &\quad \left[\frac{p+1}{2}\right] - \left[\frac{p}{2}\right] + \frac{1}{2}
 \end{aligned}$$

Kampe de Fériet function を用いる

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \frac{i (-\gamma)^k}{2\pi^{3/2} k!} a^{2\left[\frac{p+1}{2}\right]-p} \frac{\Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] - m + \frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] - n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] - \left[\frac{p}{2}\right] + \frac{1}{2}\right) \Gamma\left(2\left[\frac{p+1}{2}\right] - m - n + 1\right)} \\
 &\quad \times \Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] - m - n + \frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\left[\frac{p+1}{2}\right] + \frac{1}{2}\right) (F^* + i F) \\
 F &= F \left[ \begin{matrix} 4 & \left[\frac{p+1}{2}\right] - m + \frac{1}{2}, \left[\frac{p+1}{2}\right] - n + \frac{1}{2} \\ & \left[\frac{p+1}{2}\right] - m - n + \frac{1}{2}, \left[\frac{p+1}{2}\right] + \frac{1}{2} \\ 0 & \\ 2 & \left[\frac{p+1}{2}\right] - \frac{m+n}{2} + \frac{1}{2}, \left[\frac{p+1}{2}\right] - \frac{m+n}{2} + 1 \\ 1 & \left[\frac{p+1}{2}\right] - \left[\frac{p}{2}\right] + \frac{1}{2} ; k+1 \end{matrix} \right] \left[ \frac{a^2}{4}, \frac{\gamma^2}{4} \right] \quad (14)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_2 &= \frac{i(-)^{m+n}}{\pi^{5/2}} \left(\frac{ay}{2}\right)^L a^{2[\frac{m+n+1}{2}] - m - n} \sum_k \frac{1}{k! \Gamma(k+l+1)} \left(\frac{y^2}{4a^2}\right)^k \\
&\quad \times \sum_j \frac{\Gamma(j + [\frac{m+n+1}{2}] - m + \frac{1}{2}) \Gamma(j + [\frac{m+n+1}{2}] - n + \frac{1}{2})}{j! \Gamma(j + [\frac{m+n+1}{2}] - [\frac{m+n}{2}] + \frac{1}{2})} \\
&\quad \times \Gamma(j + [\frac{m+n+1}{2}] - m - n + \frac{1}{2}) \Gamma(j + [\frac{m+n+1}{2}] + \frac{1}{2}) \\
&\quad \times \Gamma(2k - 2j - 2[\frac{m+n+1}{2}] + p) a^{2j} \quad (15)
\end{aligned}$$

第三番目  $n$  pole の

$$\begin{aligned}
I_3 &= \frac{\sqrt{\kappa}}{2} (-)^{l+m+1} a^{2[\frac{p}{2}] + 1 - p} y^L \frac{1}{\Gamma([\frac{p}{2}] - [\frac{p+1}{2}] + \frac{3}{2})} \\
&\quad \times \sum_k \frac{\Gamma([\frac{p}{2}] + k + 1) \Gamma([\frac{p}{2}] - m + k + 1) y^{2k}}{k! \Gamma(k+l+1) \Gamma(2k + 2[\frac{p}{2}] - m - n + 2) \Gamma(m - [\frac{p}{2}] - k)} \\
&\quad \times \frac{1}{\Gamma(m+n - [\frac{p}{2}] - k)} {}_4F_3 \left( \begin{matrix} [\frac{p}{2}] + k + 1, [\frac{p}{2}] - m + k + 1, \\ [\frac{p}{2}] - \frac{m+n}{2} + k + 1, \end{matrix} \right. \\
&\quad \left. \begin{matrix} [\frac{p}{2}] - m - n + k + 1, [\frac{p}{2}] - m + k + 1, \\ [\frac{p}{2}] - [\frac{p+1}{2}] + \frac{3}{2}, [\frac{p}{2}] - \frac{m+n}{2} + k + \frac{1}{2} \end{matrix} ; \frac{a^2}{4} \right) \quad (16) \\
&= \frac{\sqrt{\kappa}}{2 l!} (-)^{l+m+1} a^{2[\frac{p}{2}] + 1 - p} y^L \frac{\Gamma([\frac{p}{2}] + 1) \Gamma([\frac{p}{2}] - m + 1)}{\Gamma([\frac{p}{2}] - [\frac{p+1}{2}] + \frac{3}{2})} \\
&\quad \times \frac{1}{\Gamma(2[\frac{p}{2}] - m - n + 2) \Gamma(m - [\frac{p}{2}]) \Gamma(m+n - [\frac{p}{2}])}
\end{aligned}$$

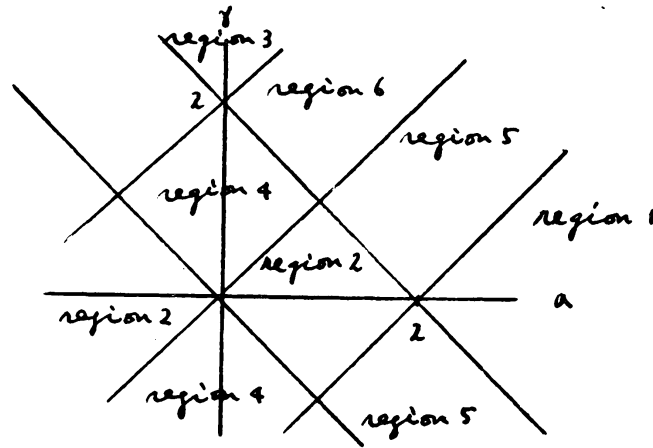


$$F = \left[ \begin{array}{c|cc} 4 & \left(\frac{p}{2}\right) - m - n + 1, \left(\frac{p}{2}\right) - m + 1 & \\ & \left(\frac{p}{2}\right) - m + 1, \left(\frac{p}{2}\right) + 1 & \\ 0 & & \frac{a^2}{4}, \frac{\gamma^2}{4} \\ 2 & \left(\frac{p}{2}\right) - \frac{m+n}{2} + 1, \left(\frac{p}{2}\right) - \frac{m+n}{2} + \frac{3}{2} & \\ 1 & \left(\frac{p}{2}\right) - \left(\frac{p+1}{2}\right) + \frac{3}{2}; l+1 & \end{array} \right] \quad (17)$$

(14) 式<sup>a</sup>の収束領域は (13) 式<sup>a</sup>の場合と同様に (2)

$$2 - |\gamma| > |a| > |\gamma| \quad (18)$$

を得る。この等式の結果は  $l=0$ ,  $\gamma \rightarrow 0$  の桂、猪苗代<sup>3)</sup> (第2図の region 2)。  
Square lattice の結果と一致 (2, 11, 3)。



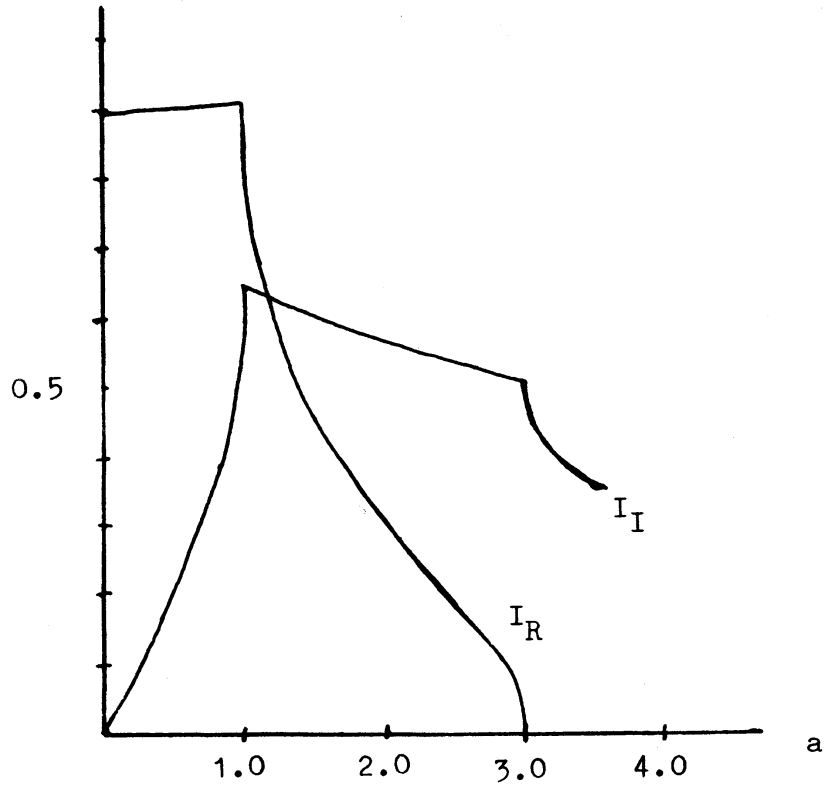
(第2図)

以上、第2図の region 1 と region 2 における級数展開を求めたが、 $a-\gamma$  平面で他の領域 $n$ の解析接続は (6) 式より次のようにして与えられる。詳細は references 1) に報告する。

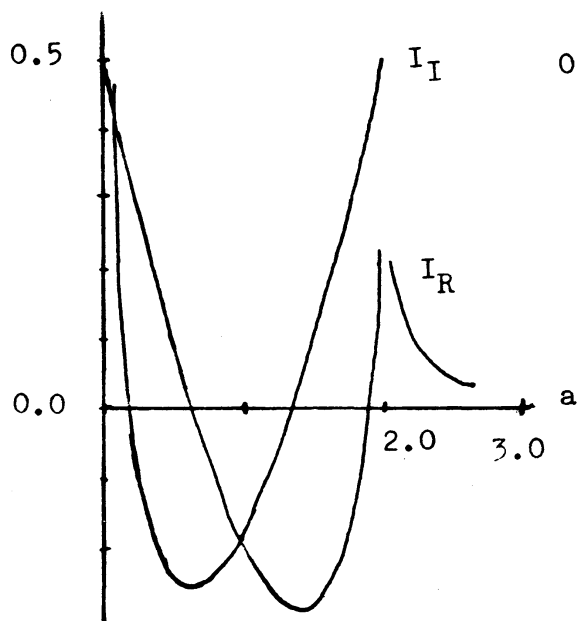
	argument of hypergeometric function	$ds$ の積分路 ((.)) 式)
region 1	$z$	右半面に閉じ
region 2	$z$	左
region 3	$\frac{1}{z}$	右
region 4	$\frac{1}{z}$	左
region 5	$1-z$	
region 6	$1-\frac{1}{z}$	

こゝ等ゝ表式は省略するが (9), (14), (15), (17) 式と共に  
数値計算に付する有用な subroutine を与える。数値計算例を  
次頁にかかげる。なお  $I(a; 0, 0, 0; 1)$  の結果は守田堀口<sup>3)</sup>  
と一致する。

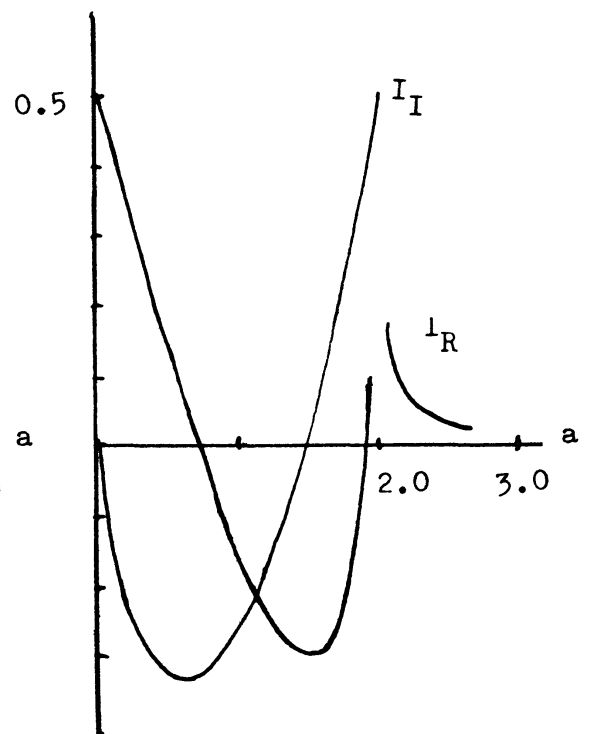
$$I(a; 0, 0, 0; 1)$$



$$I(a; 0, 2, 0; 0)$$



$$I(a; 0, 2, 1; 0)$$



## Appendix 1.

Orthorhombic lattice の L.G.F. は

$$|a| > |a| + |b| + |c| \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{1}{a} \frac{p!}{l! m! n!} \left(\frac{a}{2a}\right)^l \left(\frac{b}{2a}\right)^m \left(\frac{c}{2a}\right)^n \\ &+ \sum_l \sum_m \sum_n \frac{\left(\frac{p}{2}+1\right)_{l+n+s} \left(\frac{p+1}{2}\right)_{l+n+s}}{l! n! s! (l+1)_l (n+1)_n (s+1)_s} \left(\frac{a}{a}\right)^{2l} \left(\frac{b}{a}\right)^{2n} \left(\frac{c}{a}\right)^{2s} \end{aligned}$$

他の領域への解析接続は 2.11.2 は検討中である。

## Appendix 2.

Kampe de Fériet function is

$$F \left[ \begin{array}{c} \mu \\ \nu \\ \rho \\ \sigma \end{array} \middle| \begin{array}{c} \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_\mu \\ \beta_1, \dots, \beta_\nu; \beta'_1, \dots, \beta'_\nu \\ \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_\rho \\ \delta_1, \dots, \delta_\sigma; \delta'_1, \dots, \delta'_\sigma \end{array} \middle| x, y \right]$$

$$= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha_1)_{j+k} \dots (\alpha_\mu)_{j+k} (\beta_1)_j \dots (\beta_\nu)_j (\beta'_1)_k \dots (\beta'_\nu)_k x^j y^k}{j! k! (\gamma_1)_{j+k} \dots (\gamma_\rho)_{j+k} (\delta_1)_j \dots (\delta_\sigma)_j (\delta'_1)_k \dots (\delta'_\sigma)_k}$$

is  $F$ ,  $\tau$  defined as 3.  $z = z''$ 

$$(a)_n = a \cdot (a+1) \dots (a+n-1)$$

 $\bar{F}$  is modified Kampe de Fériet function is

$${}^*F \left[ \begin{array}{c} \mu \\ \nu \\ \rho \\ \sigma \end{array} \middle| \begin{array}{c} \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_\mu \\ \beta_1, \dots, \beta_\nu; \beta'_1, \dots, \beta'_\nu \\ \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_\rho \\ \delta_1, \dots, \delta_\sigma; \delta'_1, \dots, \delta'_\sigma \end{array} \middle| x, y \right]$$

$$= \frac{1}{\pi} \sum_k \sum_j \frac{(\alpha_1)_{j+k} \dots (\alpha_\mu)_{j+k} (\beta_1)_j \dots (\beta_\nu)_j (\beta'_1)_k \dots (\beta'_\nu)_k x^j y^k}{j! k! (\gamma_1)_{j+k} \dots (\gamma_\rho)_{j+k} (\delta_1)_j \dots (\delta_\sigma)_j (\delta'_1)_k \dots (\delta'_\sigma)_k}$$

$$\times \left\{ -\psi(\alpha_1 + j + k) \dots -\psi(\alpha_\mu + j + k) - \psi(\beta_1 + j) \dots -\psi(\beta_\nu + j) \right.$$

$$\left. + \psi(\gamma_1 + j + k) \dots + \psi(\gamma_\rho + j + k) + \psi(\delta_1 + j) \dots + \psi(\delta_\sigma + j) \right\}$$

$$+ \psi(j+1) - \log |x| \}$$

定義 7.3.

3)  $F(13)$  2"

$${}_p\tilde{F}_q \left( \begin{matrix} a_1, a_2, \dots, a_p \\ b_1, b_2, \dots, b_q \end{matrix} ; z \right)$$

$$= \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a_1)_k \dots (a_p)_k}{k! (b_1)_k \dots (b_q)_k} z^k$$

$$= \left\{ \psi(k+1) + \psi(b_1+k) \dots + \psi(b_q+k) - \psi(a_1+k) \right. \\ \left. \dots - \psi(a_p+k) - \log |z| \right\}$$

定義 11.5 の F.

## References

- 1) Y. Abe and S. Katsura, Lattice Green's function for the tetragonal lattice. in preparation.
- 2) S. Katsura, T. Morita, S. Inawashiro, T. Horiguchi and Y. Abe, Lattice Green's function. Introduction, J. Math. Phys. to be published.
- 3) S. Katsura and S. Inawashiro, Lattice Green's function for the rectangular and the square lattices at arbitrary points, J. Math. Phys. to be published.